



TITLE:

ソフトマターの相転移ダイナミクス

AUTHOR(S):

荒木, 武昭

CITATION:

荒木, 武昭. ソフトマターの相転移ダイナミクス. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 34-34

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230734>

RIGHT:

ソフトマターの相転移ダイナミクス

Phase transition dynamics in soft matters

京都大学 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 荒木 武昭

研究成果概要

汎用分子動力学シミュレーションを用いて、ネマチック液晶に対する不純物効果、外場応答に対するスリッパリー層の効果を調べた。バルクの液晶分子は、アスペクト比 3 の Gay-Berne 粒子を用いる。また、壁は同じ Gay-Berne 粒子を x 軸方向に揃えたもので記述することにする。これにより、外場やスリッパリー層がない状態では、 x 軸方向に向いたプラナー配向を示すことが予想される。デフォルトのシミュレーションソフトでは、Gay-Berne 粒子に対して、外場によって配向を制御することができなかった。そこでソースを編集し、外場 E を掛けることができるように改造した。不純物は、0%~10%の Gay-Berne 粒子を任意に選び、Lennard-Jones 粒子で置き換えることで導入することにした。GB 粒子と壁粒子間、GB 粒子と LJ 粒子、LJ 粒子と壁間の相互作用の強さは任意に変えることができる。

図 1 は、不純物を含まない系(左)と含む系(右)の粒子は一のスナップショットである。緑粒子は GB 粒子を表し、右図では、不純物粒子が分かるよう半透明にした。青粒子は壁の粒子、灰粒子は不純物である。相互作用の強さは、 $\epsilon_{GG} = 1, \epsilon_{GW} = 0.25, \epsilon_{GL} = 0.5, \epsilon_{LL} = 1, \epsilon_{WL} = 3$ とした。(G は GB 粒子、W は壁粒子、L は LJ 粒子を表す)。温度は、 $T/\epsilon_{GG} = 0.9$ としており、バルクではネマチック相を表す。不純物がない系では、外場に対し、フレデリクス転移と電場消去後、もとの配向に戻ることが確認できた。一方、不純物を含む系では、ネマチック秩序が壁付近で減少しており、特に不純物が壁を覆いつくすときには、アンカリング強度が極めて小さくなり、外場に対して変形したのち復元力を示さないことが分かった。

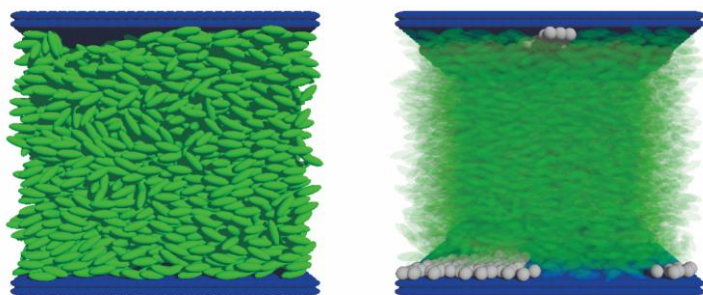


図 1 分子動力学シミュレーションによる不純物を含まないネマチック液晶と(左)と含む系(右)のスナップショット。不純物の数密度は 10%

発表論文 (謝辞あり)

Armand Barbotab and Takeaki Araki, “Colloidal suspensions in one-phase mixed solvents under shear flow”, *Soft Matter* **13**, 5991-5921 (2017).